

BAB V KESIMPULAN DAN SARAN

5.1 Kesimpulan

Dari penelitian yang dilakukan mengenai studi komputasi aktivitas antioksidan dan sitotoksik senyawa turunan xanton telah dipelajari melalui analisis DFT/B3LYP/6-31G. Kereaktifan senyawa turunan xanton dapat diurutkan sebagai : 3-isomangostin > β -mangostin > gartanin > 8-desoxygartanin = 9-hidroxy-calabaxanton = α -mangostin. Berdasarkan parameter kereaktifannya, senyawa 3-isomangostin murni lebih baik dibandingkan 3-isomangostin glikosida.

Berdasarkan mekanisme reaksi antioksidan, mekanisme pemutusan ikatan OH yang menghasilkan $H\cdot$ dan $ArO\cdot$ lebih cocok dengan mekanisme SET-PT karena dihasilkan energi total IP + PDE yang lebih kecil. Penentuan toksisitas senyawa turunan xanton dengan program OSIRIS menunjukkan bahwa senyawa turunan xanton memenuhi aturan Lipinsky sebagai kandidat obat, tidak bersifat tumorgenetik dan tidak menyebabkan iritasi. Penambahan gugus penarik elektron NO_2 baik pada posisi C4 maupun C5 pada senyawa 3-isomangostin dapat meningkatkan nilai IC_{50} . Semakin besar harga IC_{50} maka senyawa tersebut semakin tidak toksik terhadap sel kanker, semakin kecil nilai IC_{50} maka semakin besar aktivitas antioksidannya. Maka senyawa 3-isomangostin tanpa dimodifikasi lebih besar aktivitas antioksidannya dibandingkan dengan yang dimodifikasi dengan penambahan gugus penarik elektron NO_2 .

Persamaan HKSA terbaik analisis regresi multilinear pada aktivitas antioksidan ($\log IC_{50}$) dengan nilai ETE, PDE, dan IP sebagai variabel bebas adalah sebagai berikut :

$$Y = -29,603 + (-6,832) (IP) + (-3,447) (PDE) + 3,237 (ETE)$$

Analisis regresi multilinear pada aktivitas sitotoksik ($\log IC_{50}$) dengan qC_1 , qO , *polarizability* (Pol), $\log P$, momen dipol, E_{HOMO} , dan E_{LUMO} sebagai variabel bebas, maka diperoleh persamaan terpilih HKSA adalah sebagai berikut :

$$Y = 30,240 + 7,303 (qC_1) + 35,604 (qO) + (-0,026) (Pol) + (-0,285) (\text{momen dipol}) + (-0,567) (E_{LUMO})$$

Berdasarkan studi *docking* molekular pada senyawa turunan xanton secara keseluruhan molekul 3-isomangostin dan gartanin memiliki interaksi yang lebih banyak dengan protein, sehingga lebih potensial sebagai kandidat obat

5.2 Saran

Penelitian selanjutnya disarankan untuk melakukan penelitian dengan senyawa lain yang memiliki sifat antioksidan dan toksisitas yang tinggi dan berpotensi sebagai kandidat obat.

